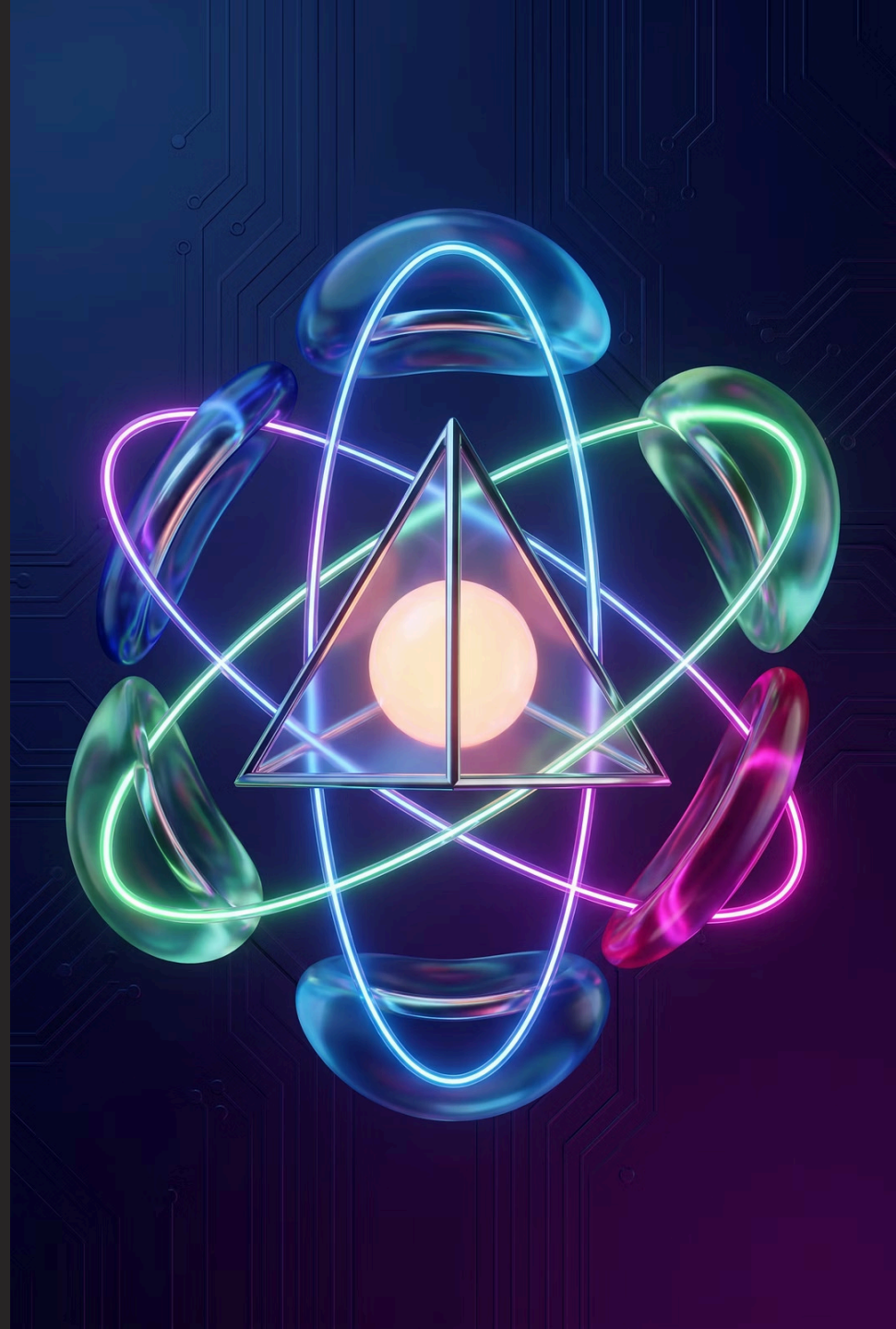
Değerlik Bağı Kuramı ve Hibritleşme

Maddenin Geometrik Düzeni

DERS SUNUMU TERADİGMA



Neden Her Molekülün Bir Şekli Var?

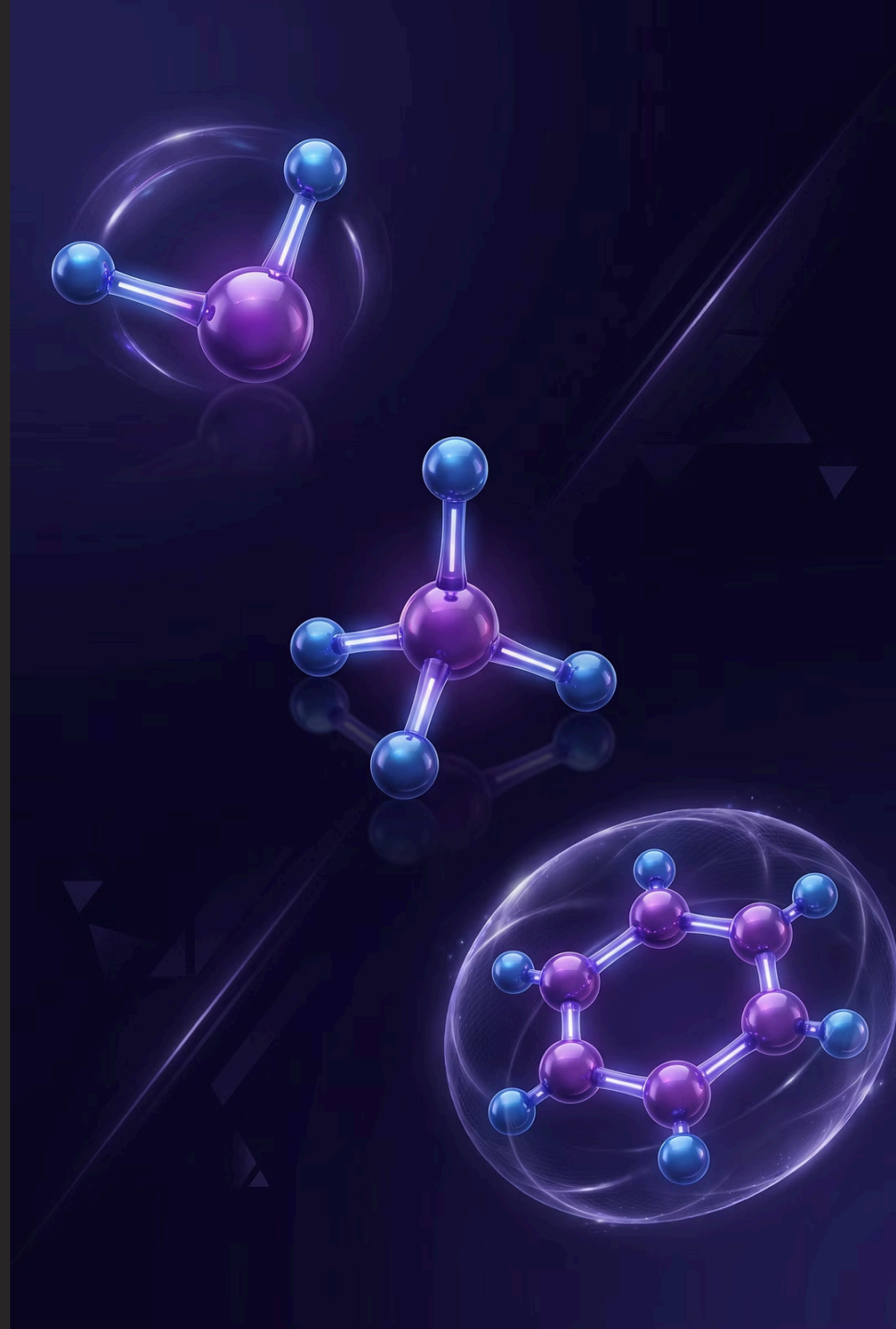
Suyun bükülü yapısı, metanın piramit geometrisi, benzenin altıgen halkası — bunların hiçbiri rastlantı değil.

Elektronların Yeniden Düzenlenmesi

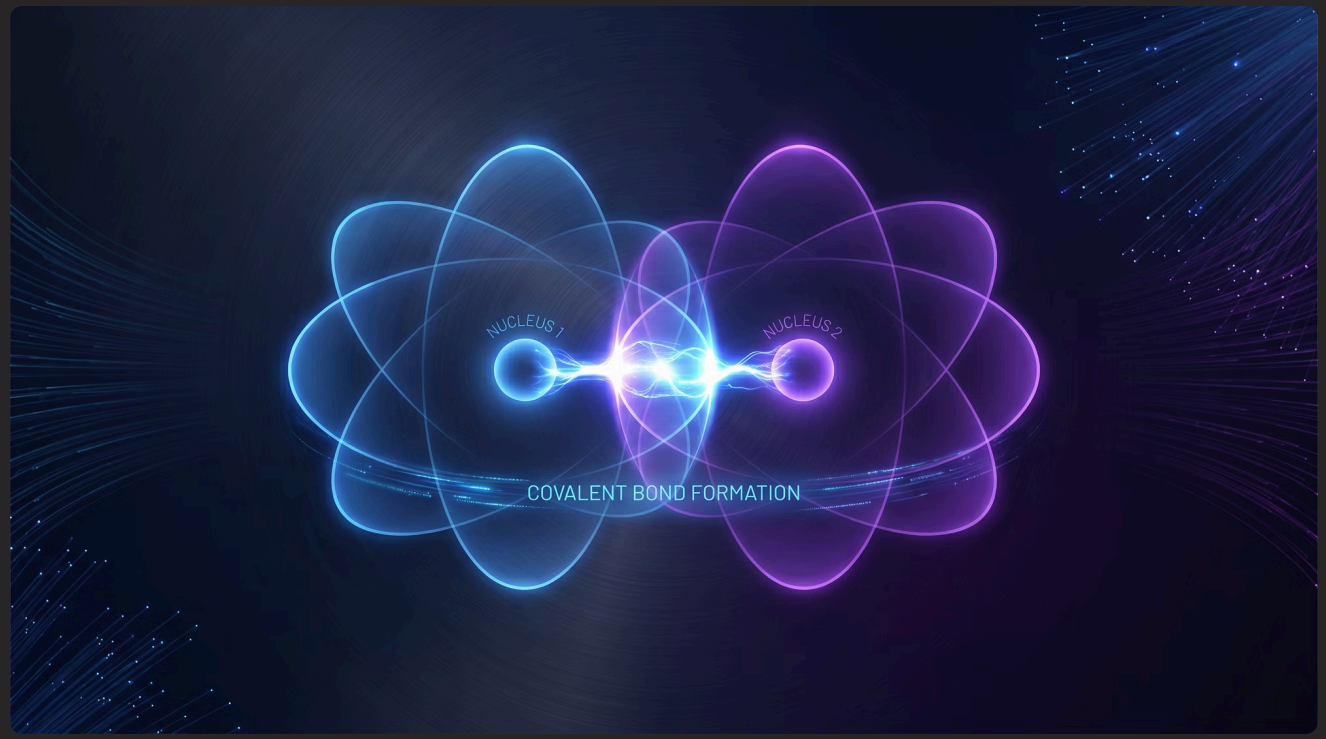
Atomlar bağ kurduğunda elektronlar uzayda yeniden düzenlenir ve bu yeniden düzenleme moleküle özgün bir mimari kazandırır.

Değerlik Bağı Kuramı

Arkasındaki mekanizma: **değerlik bağı kuramı** ve **hibritleşme** — maddenin geometrik düzeninin temel açıklayıcıları.



Kimyasal Bağ Nasıl Oluşur?



Değerlik bağı kuramına göre bağ, iki atomun orbitallerinin örtüşmesiyle kurulur.

Elektron Paylaşımı

Örtüşme bölgesinde elektronlar iki atom arasında paylaşılır.

Saf Orbitallerin Yetersizliği

Saf atomik orbitaller (s, p, d, f) gözlemlenen molekül geometrilerine her zaman uymaz.

Hibritleşme Devreye Girer

Bu noktada devreye giren süreç: **hibritleşme**.

Hibritleşme Nedir?

Hibritleşme; bir atomun değerlik orbitallerinin matematiksel olarak birleşip yeni hibrit orbitaller oluşturması işlemidir.

Farklı Özellikler

Hibrit orbitaller saf orbitallerden farklı şekil, yönelim ve enerjiye sahiptir.

Yeniden Düzenlenme

Atomun mevcut yapısı, kuracağı bağa göre yeniden düzenlenmiş olur.

Üç Temel Tür

sp^3, sp^2, sp — her biri farklı bir geometrik sonuç doğurur.

> Atom matematikten habersizdir; yine de sonuç matematiksel açıdan en kararlı geometriyi verir. Bu düzenin maddeye nasıl yerleştirildiği, üzerinde düşünülmeye değer bir sorudur.

sp^3 Hibritleşmesi — Tetrahedrik Geometri

Karbonun bir s ve üç p orbitali birleşerek dört özdeş sp^3 hibrit orbitali oluşturur.

01

Maksimum Uzaklaşma

Bu dört orbital uzayda birbirinden maksimum uzakta konumlanır.

02

109,5° Açı

Ortaya çıkan açı: **109,5°**, geometri: **tetrahedrik**.

03

CH_4 — Metan

Dört hidrojen atomu tam bu açılarla yerleşir; mükemmel tetrahedrik yapı oluşur.

sp^3 hibritleşmesinde 1 adet s + 3 adet p orbitali → 4 özdeş hibrit orbital

sp^2 Hibritleşmesi — Düzlemsel Geometri

Bir s ve iki p orbitali birleşerek üç sp^2 hibrit orbitali oluşturur.

120° Düzlemsel Yönelim

Üç orbital aynı düzlemde, **120° açıyla** yönlenir.

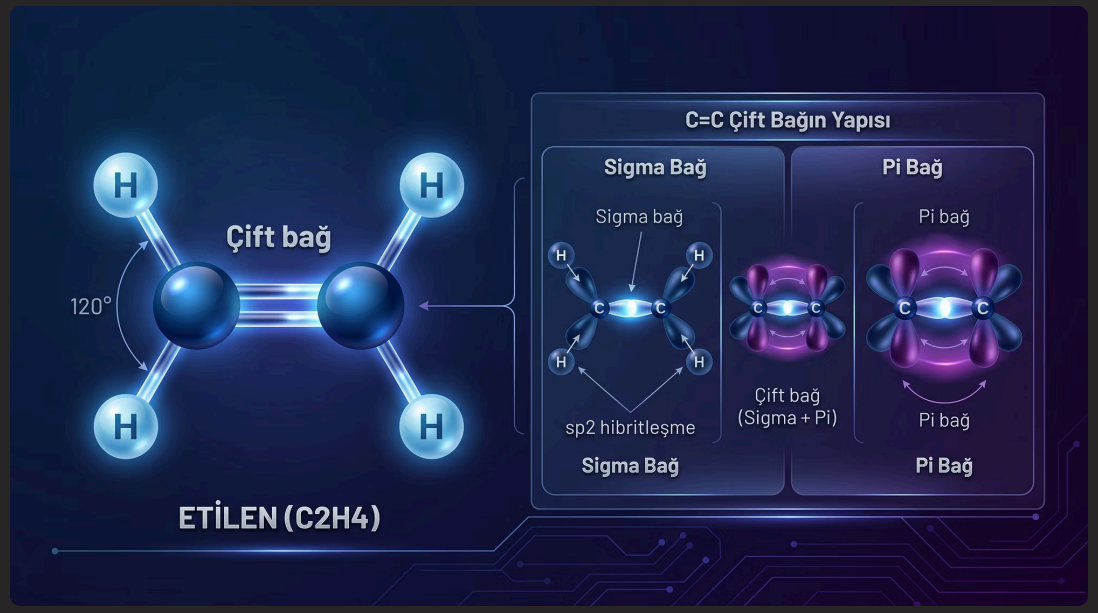
Dik p Orbitali

Hibritleşmeye katılmayan p orbitali düzleme dik kalır.

σ ve π Bağları

Dik p orbitalleri yan yana gelerek **pi (π) bağı** oluştururken sp^2 orbitalleri **sigma (σ) bağları** kurar.

sp^2 Hibritleşmesi — Etilen Örneği



Etilende (C_2H_4) iki karbon atomu sp^2 hibritleşmesi sergiler.

Düzlemsel Geometri

Tüm atomlar aynı düzlemde yer alır; sonuç düzlemsel molekül geometrisidir.

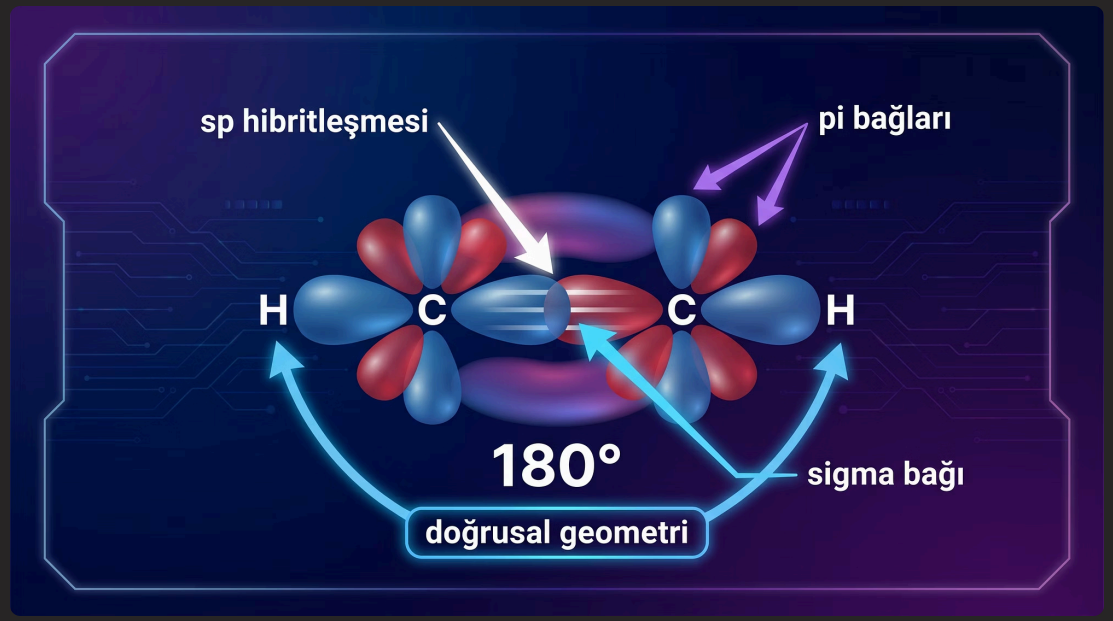
Dönme Engeli

π bağı, iki karbon arasındaki dönmeyi engeller.

Rijit İskelet

Moleküle rijit bir iskelet kazandırılmış olur.

sp Hibritleşmesi — Doğrusal Geometri



Bir s ve bir p orbitalinin birleşmesiyle iki sp hibrit orbitali oluşur.

01

180° Doğrusal Hizalanma

Bu iki orbital **180° açıyla** tamamen doğrusal hizalanır.

02

İki Ayrı π Bağı

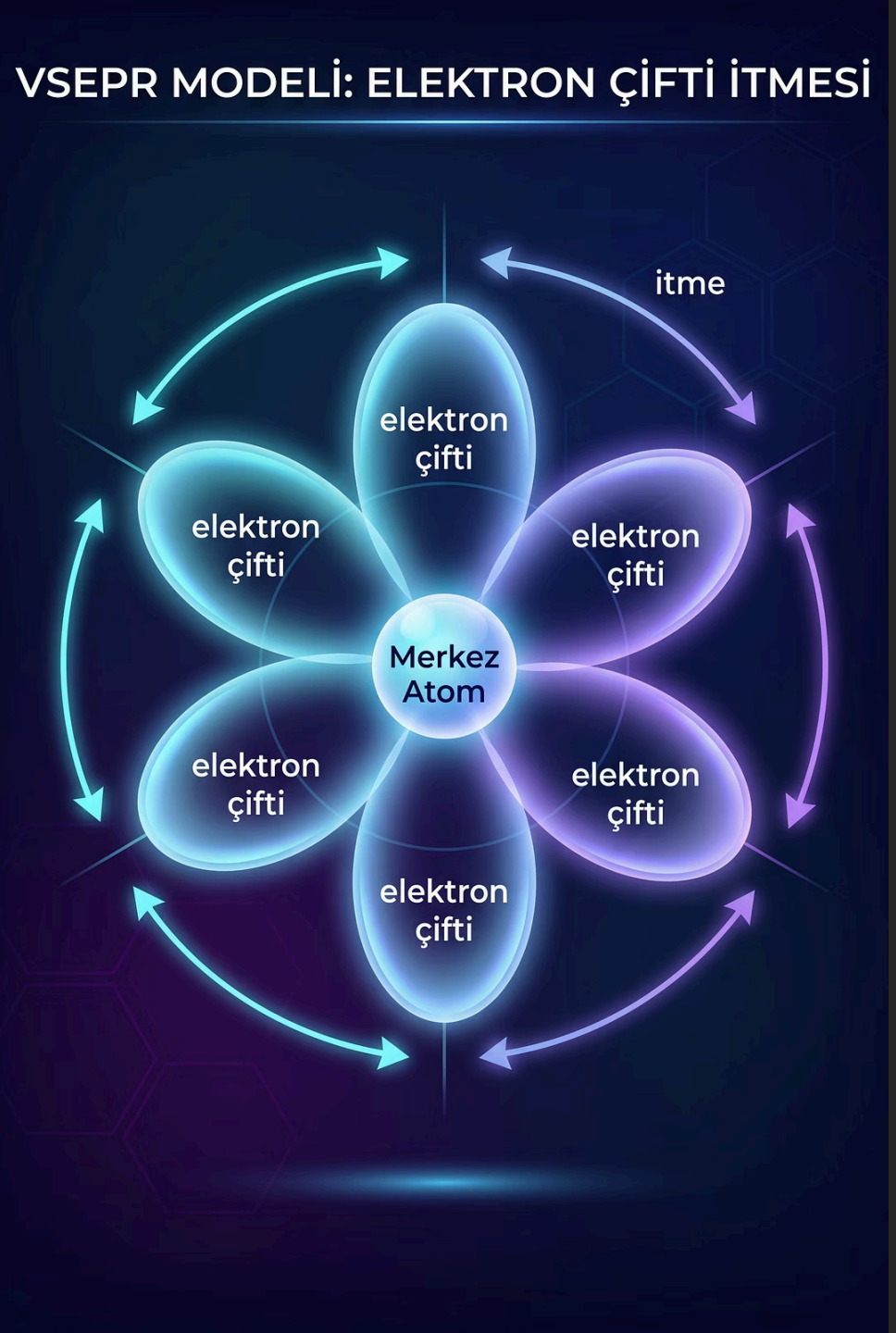
Geriye kalan iki p orbitali birbirine dik iki ayrı π bağı kurar.

03

C_2H_2 — Asetilen

Üçlü bağ ve doğrusal molekül geometrisi; sp hibritleşmesinin en bilinen örneği.

sp hibritleşmesinde 1 adet s + 1 adet p orbitali → 2 hibrit orbital + 2 serbest p orbitali



VSEPR Kuramı — Geometriyi Belirleyen İtme

Hibritleşme tek başına yeterli değildir; molekülün nihai şekli elektron çiftlerinin uzaydaki dizilimine bağlıdır.

VSEPR İlkesi

Elektron çiftleri birbirinden maksimum uzakta konumlanır — bu temel ilke molekül şeklini belirler.

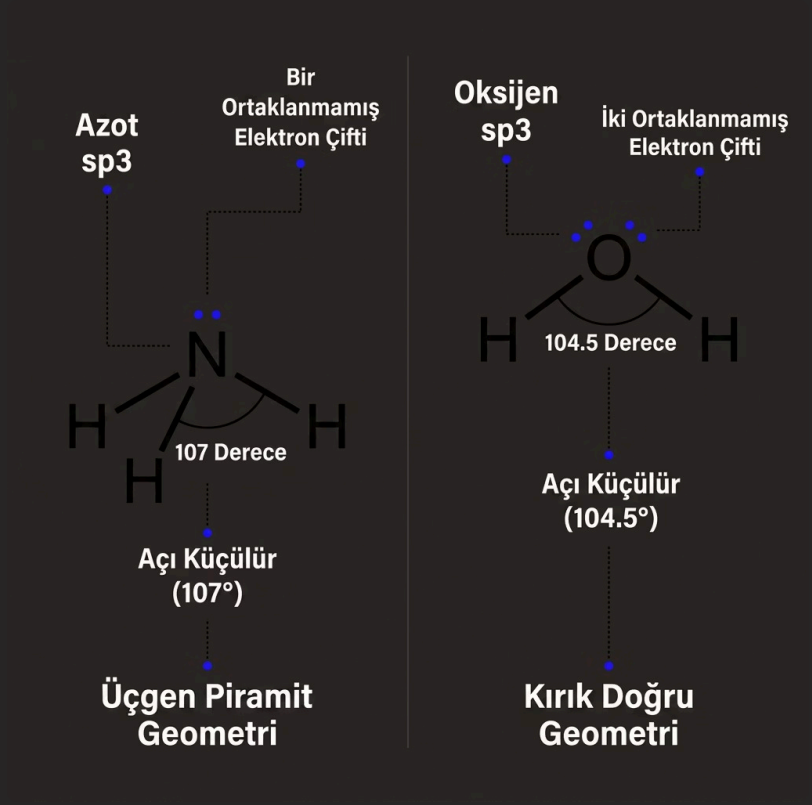
Tüm Çiftler Hesaba Katılır

Hem bağ yapan hem bağ yapmayan (yalnız) elektron çiftleri hesaba katılır.

Yalnız Çiftlerin Etkisi

Yalnız çiftler, bağ çiftlerinden daha fazla yer kaplar ve açıyı daraltır.

VSEPR — Su ve Amonyak Örnekleri



Her molekül için "en az enerjili, en kararlı" geometri elde edilir. Atomlar enerji minimizasyonu kavramından habersizdir; yine de her seferinde tam olarak bu sonuca ulaşılır.

Su (H_2O)

Oksijen sp^3 hibritleşir; iki yalnız çift açıyı 109,5°'den **104,5°'ye** düşürür → **bükülü geometri**

Amonyak (NH_3)

Azot sp^3 hibritleşir; bir yalnız çift açıyı **107°'ye** düşürür → **piramit geometri**

Suyun 104,5° Açısı — Tesadüf mü?

Suyun bükülü geometrisi, yaşam için kritik sonuçlar doğurur.

Dipol Momenti

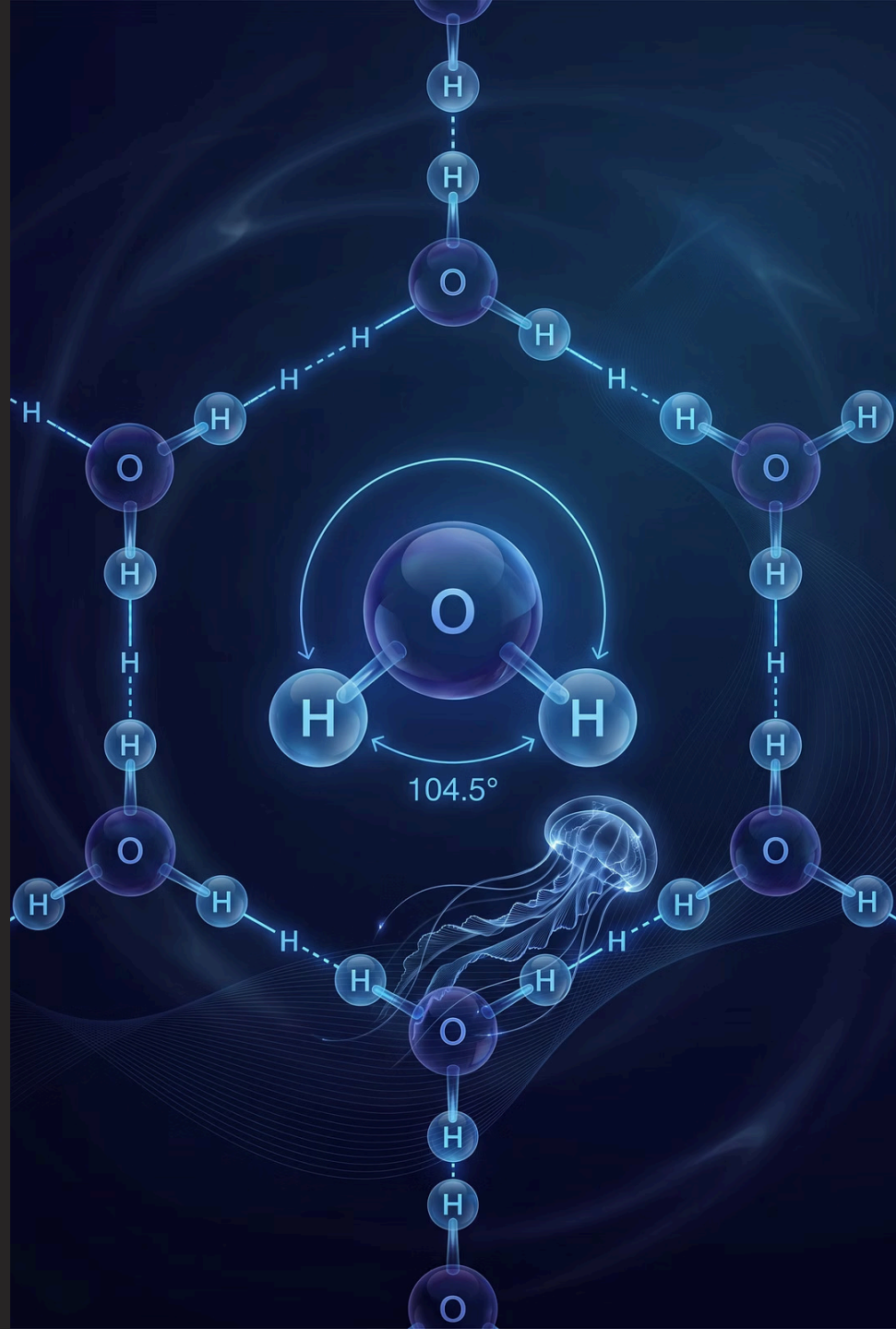
Doğrusal olsaydı dipol momenti oluşmazdı, çözücü özellikleri kaybolurdu.

Hidrojen Bağları

Açı farklı olsaydı hidrojen bağları değişir, buzun yoğunluğu değişir, okyanuslar donardı.

104,5°'nin Kaynağı

Bu değer; hibrit orbitallerin şekli, yalnız çiftlerin kapladığı hacim ve elektronların oksijen çevresindeki dizilimi tarafından belirlenir.



Atomlar Matematik Bilmez — Ama Sonuçlar Matematikseldir

Elektronların davranışı Schrödinger denklemiyle tanımlanır:

$$H\psi = E\psi$$

Denklemin Kusursuz Uyumu

Elektronlar bu denklemi "çözmez"; yine de davranışları denklemin çözümlerine kusursuz biçimde uyar.

Geometrik Optimizasyon Noktaları

109,5°, 120°, 180° açıları; itmelerin minimumda tutulduğu geometrik optimizasyon noktalarıdır.

Şuursuz Parçacıklar, Kararlı Düzen

Şuursuz parçacıklar her seferinde en kararlı düzene ulaşır.

> Maddeye yerleştirilmiş bu optimizasyon kapasitesini kör tesadüflere atfetmek, sonucu açıklamaz; yalnızca soruyu ertelemektedir.

Hibritleşme: Ortama Göre Değişen Bir Kapasite

Karbon, kurduğu bağa göre farklı hibritleşme sergiler.

1

sp^3 → Metan

Metan oluşturacaksa karbon sp^3 hibritleşmesi sergiler; tetrahedrik geometri.

2

sp^2 → Etilen

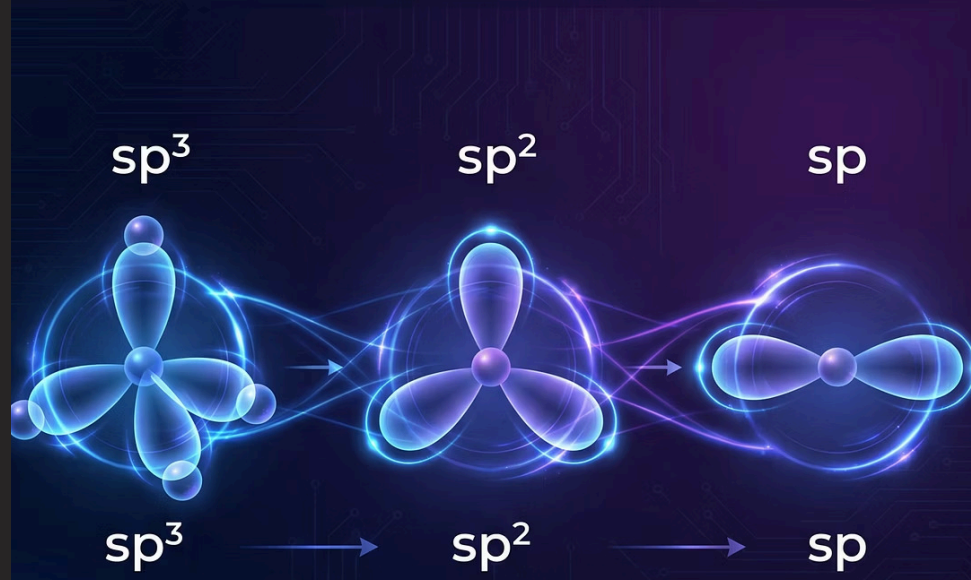
Etilen oluşturacaksa sp^2 hibritleşmesi devreye girer; düzlemsel geometri.

3

sp → Asetilen

Asetilen oluşturacaksa sp hibritleşmesi gerçekleşir; doğrusal geometri.

Kimyasal ortam yalnızca bir tetikleyicidir. Asıl mesele atomun bu tetikleyiciye yanıt verebilme kapasitesinin, evrenin fiziksel yasalarına önceden kodlanmış olmasıdır. Bu kodu kimin yazdığı sorusu, kimyanın kendisinin cevaplayamayacağı bir sorudur.



Genel Bakış: Geometrik Düzenin Özeti

Hibritleşme	Orbital Sayısı	Açı	Geometri	Örnek
sp^3	4	109,5°	Tetrahedrik	CH_4
sp^2	3	120°	Düzlemsel üçgen	C_2H_4
sp	2	180°	Doğrusal	C_2H_2

Yalnız Çiftlerin Etkisi

Yalnız elektron çiftleri geometriyi daraltır: H_2O → 104,5°, NH_3 → 107°

Maddenin Hassas Düzeni

Her açı, her orbital, her geometri; maddenin derinliklerine işlenmiş hassas bir düzenin yansımasıdır.